臨界現象のモンテカルロ : どんなHamiltonianがよいか(基研研究会「統計物理の展望」,研究会報告)

板倉, 充洋

臨界現象のモンテカルローどんなHamiltonianがよいか

日本原子力研究所・計算科学技術推進センター・板倉 充洋

モンテカルロシミュレーション（以下MC）による臨界現象の研究では、臨界指数を数値的に求めることが主目標となる。実際の磁性体などにおいて観測される臨界指数が、コンピューター上の単純化されたモデルでも再現されるならば、繰り込み群の理論により予想されるユニバーサリティ仮説は非常に確実なものとなる。実際 Ising モデルのMCにより求められた臨界指数とϕ^4モデルの繰り込み理論により求められた臨界指数、及び実際の Ising 的異方性を持った磁性体の実験により得られた臨界指数は現在のところ良い精度で一致している。このことは２つの事を示唆している。１つは Ising モデルや現実の磁性体を含めた多くのモデルの、臨界点付近での長距離スケールでの振舞いがϕ^4モデルで良く表されるということであり、もう一つはϕ^4モデルで臨界指数を求めるために使われる級数展開などの近似的手法がうまくいっている、ということである。

Ising モデルのMCで臨界指数を計算する場合、以下のような有限サイズスケーリングの式を用いて臨界指数を計算する。

$$X_L(K_c) \sim L^{a/\nu}(1 + CL^{-\omega})$$

ここで $X_L(K_c)$ はサイズ L の系での物理量 X の臨界点での値で、指数 a とνはそれぞれ X と相関距離の臨界指数、指数$\omega > 0$ はスケーリングへの補正の指数である。通常は十分大きい L について計算し、補正項が十分小さいと仮定して指数 a/νを計算する。補正項は繰り込み変換の際に現れるいわゆる irrelevant な項が原因となって現れる。すなわちもとのモデルはϕ^4モデルには現れない「雑多な」項を含んでおり、さらにϕ^4モデルのパラメータ空間でも繰り込み固定点から離れた場所にあるため、それが補正となって現れるのである。しかし L を大きくとって長距離の振舞いに注目した場合、この「雑多な」項は小さくなっていき、その振舞いはϕ^4モデルの繰り込み固定点付近での振舞いに近づいていく。

このため臨界指数を精度良く計算しようと思えば大きなサイズの系の計算が必要になり、高速に計算することが求められる。スピン１／２ Ising モデルはこの高速性という面から見るとＭＣにもっとも適しているため、これまでに膨大な量の数値計算が行われてきた。しかしここで見方を少し変えると、多少計算コストがかかっても、式（１）にある補正の係数 C が小さいような都合の良いモデルをみつけて計算する、という戦略もあることが分かる。このようなモデルでは比較的小さいサイズの系の計算で臨界指数を精度良く計算できることが予想される。このようなモデルは高エネルギーの分野で improved action と呼ばれてよく使われるようである。実際このような手法を Ising モデルのＭＣに適用した例が最近報告された (hep-lat/9805022)。

こうした戦略はあらかじめϕ^4モデルの繰り込み固定点近辺から出発しようというもので、定性的に良く分かっている相転移を高い精度で定量的に調べるものだといえる。

これとは逆にϕ^4モデルの枠組の中でもまだよく分かっていないモデルの振舞いを定性的に調べるという方針もある。たとえば cubic なスピン異方性をもつ N−vector モデル

$$(\nabla\phi)^2 + r\phi^2 + u(\phi^2)^2 + v\phi_i^4$$

は、$N < N_c$のとき等方的固定点が、$N > N_c$のとき異方的固定点がそれぞれ安定になるが、最近 $N_c \approx 3$ であることが分かってきた。
(H. Kleinert and V. Schulte-Frohlinde, Phys. Lett. B,**342**,284 (1995))
これを確かめるには、いろいろな u と v の値について、サイズ L の系全体を一つのスピンとみなしてその臨界点における確率分布を調べ、その異方性がサイズと共に増強されるか小さくなるかを見れば、これは繰り込み変換によりもとの Hamiltonian が当方的、異方的どちらの固定点に近付いていくかをみていることになる。

このようにある相転移のＭＣを行なう時、出発点となる Hamiltonian をいろいろと変えてみることにより、高い精度の定量的な計算や、より明確な定性的議論が可能になる。対象とする現象の本質は損なわず、かつＭＣに都合がいいように Hamliltonian を改造するというアプローチは計算の高速化とならんで今後ＭＣにおいて重要な要素になると思われる。